

1. Morodome S., Kawamura K. Swelling behavior of Na-and Ca-montmorillonite up to 150°C by in situ X-ray diffraction experiments // Clays and Clay Minerals. – 2009. – V. 57. – №. 2. – P. 150-160.
2. Pamukcu S. Electro-chemical technologies for in-situ restoration of contaminated subsurface soils // Electronic journal of geotechnical engineering. – 1997. – V. 2.

### **РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ $O^-$ И $H^+$ В ГИДРАТНОЙ ОБОЛОЧКЕ ИОНОВ ПРИ ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С МИНЕРАЛОМ ГЛИНЫ**

Ван Цайлунь, Шукшина Д. Д.

Научный руководитель: Мышкин В.Ф., д.ф.-м.н., профессор

Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 2

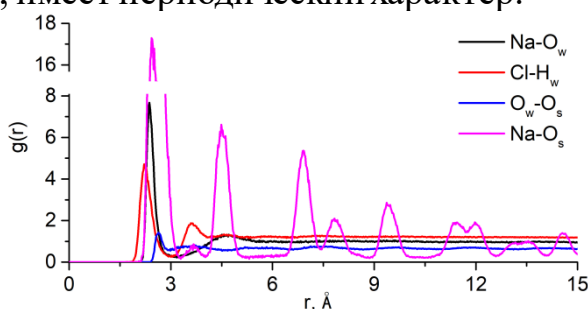
E-mail: [caylun1224@gmail.com](mailto:caylun1224@gmail.com)

Глинистые минералы широко распространены в окружающей среде. Благодаря своим физико-химическим свойствам и возможности к набуханию при контакте с водой, они стали предметом исследований во многих областях.

Гидратированные ионы в процессе диффузии взаимодействуют с поверхностью глины с образованием комплексов внутренней и внешней сфер. Поэтому гидратация влияет на коэффициент диффузии ионов. Для анализа

параметров гидратной оболочки межслоевых катионов может быть использована функция радиального распределения (RDF).

На рисунке представлены RDF-кривые при взаимодействии ионов  $\text{Na}^+$  с атомами молекул воды, имеющими частичный заряд, и поверхностью глины. Используются следующие обозначения:  $\text{O}_w$  – кислород воды,  $\text{H}_w$  – водород воды,  $\text{O}_s$  – кислород на поверхность глины. Можно видеть, что кривые распределения  $\text{Na-O}_w$  и  $\text{Cl-H}_w$  имеют два пика, которые представляют первый и второй слои гидратной оболочки вокруг иона  $\text{Na}^+$ . При этом расстояние между  $\text{Cl}$  и водородом молекулы воды меньше, чем расстояние между  $\text{Na}^+$  и кислородом воды. Распределение ионов  $\text{Na}^+$ , относительно базальной поверхности минерала глины, имеет периодический характер.



Ионы  $\text{Na}^+$  также взаимодействуют с кислородом на поверхности глины  $\text{O}_s$ , сила взаимодействия которых уменьшается с каждым слоем гидратной оболочки. Отрицательный заряд на базальной поверхности слоя глины притягивает атомы водорода, входящие в молекулу воды и в то же время отталкивает атомы кислорода молекулы воды.

По мере увеличения гидратной оболочки расстояние между молекулами воды и катионами увеличивается, а сила притяжения уменьшается. Поэтому наличие гидратной оболочки катионов уменьшает коэффициент диффузии из-за увеличения их эффективной массы и увеличивает его из-за отдаления от фиксированных на базальных поверхностях зарядов.

1. Rinnert E. et al. Hydration of a synthetic clay with tetrahedral charges: a multidisciplinary experimental and numerical study // The Journal of Physical Chemistry B. – 2005. – V. 109. – №. 49. – P. 23745-23759.

## РАЗРАБОТКА РЕКОМЕНДАЦИЙ ДЛЯ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН ДЛЯ БОЛЕЕ ШИРОКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГИИ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СУЯЗ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ И ЗАРУБЕЖНЫХ СТРАН

Хужажинова К. А.

Научный руководитель: Верхотурова В. В., к. и. н., доцент  
Томский политехнический университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30  
E-mail: [kamilakhuzhazhinova@gmail.com](mailto:kamilakhuzhazhinova@gmail.com)

Несмотря на то, что Республика Казахстан является лидером по добыче урановой руды в мире, обладает технологиями изготовления топлива для реакторов, данная страна только встает на путь использования атомной энергетики. Построение АЭС влечет за собой ряд задач, таких как управление